simulated annealing と温度制御

京都大学 情報学　　宗像 豊哲
名古屋大学 情報文化　中村 泰之

simulated annealing（SA）は最適問題に対する一般的な手法として現在広く応用されているが、実際の複雑な系に対する応用計算だけでなく、SA の基礎に関する研究、例えば温度制御や残留エネルギー等理論的にも興味ある問題を提起している。温度 T を時間の関数 T(t) と考え、これに対する微分方程式を最適制御の観点から導き、その性質について議論した。

1 背景

最適化問題へのアプローチの1つとして simulated annealing(S.A.) method(擬似徐冷法) が 1983 年に開発され [1]、近年広く応用されている。これはブラウン運動あるいは熱運動を用いて状態空間の広い範囲の探索を可能にすると同時に、次第に熱運動の強度（系の温度 T）を弱めていくことにより計算の最後に、nearly optimal な解を与えることを目的とする。系の温度を計算の過程でどのようにコントロールするか、すなわち時間 t の関数として $T(t)$ をどのように定めるかについては、これまで多くの提案があるが、どちらかというと経験に基づく、個々の系に対するケーススタディであり、一貫した理論的観点に欠る。またエントロピー、比熱といった周辺の物理量についての考察がなされていなかった。以下では最適制御の観点から温度制御について考える。

2 最適制御

$p(\boldsymbol{x},t)$ を状態 $\boldsymbol{x}$ に系が見いだされる確率として、次のマスター方程式が成立する。

$$\partial p(\boldsymbol{x},t)/\partial t = \Sigma[p(\boldsymbol{x}',t)W(\boldsymbol{x}'\to\boldsymbol{x}) - p(\boldsymbol{x},t)W(\boldsymbol{x}\to\boldsymbol{x}')], \tag{1}$$

ここで $W(\boldsymbol{x}\to\boldsymbol{x}')$ は遷移確率であり、詳細釣り合いの要請を満足していると仮定する。

$$e^{-E(\boldsymbol{x})/T(t)}W(\boldsymbol{x}\to\boldsymbol{x}') = e^{-E(\boldsymbol{x}')/T(t)}W(\boldsymbol{x}'\to\boldsymbol{x}), \tag{2}$$

以下の議論のためにマスター方程式を

$$dP(t)/dt = D(t) \cdot P(t), \tag{3}$$

と表しておく。ある時刻 τ でのエネルギーの期待値 $< E > (\tau) \equiv \Sigma E(x)p(x,\tau)$ を最小にすることを考える。このため汎関数

$$\begin{aligned} G[P,T,\Lambda] \ \equiv \ & \int_0^\tau dt \Sigma_x \{E(x)\Sigma_{x'}[p(x',t)W(x' \to x) - p(x,t)W(x \to x')] \\ - \ & \Lambda(x,t)(\partial p(x,t)/\partial t - \Sigma_{x'}[p(x',t)W(x' \to x) - p(x,t)W(x \to x')])\} \end{aligned} \tag{4}$$

を導入する。ラグランジ未定乗数 Λ は分布関数がマスター方程式を満足するという拘束条件を表しており、この条件のもとでエネルギー期待値を最小にしたい。変分条件 $\delta G/\delta p(x,t) = 0$、$\delta G/\delta T(t) = 0$、$\delta G/\delta\Lambda(x,t) = 0$ より次の方程式を得る。(最後の条件は単に（1）式を与えるだけ)

$$d\Lambda(t)/dt = -D^T \cdot (\Lambda(t) + E), \tag{5}$$

$$(E + \Lambda(t))^T \cdot \partial D(t)/\partial T(t) \cdot P(t) = 0. \tag{6}$$

（5）式をといてこれを（6）に用いると

$$E^T(t) \cdot \partial D(t)/\partial T(t) \cdot P(t) = 0, \tag{7}$$

を得る。ただしここで時間に依存するエネルギー $E(t)$ を次で定義した。

$$dE(t)/dt = -D^T(t) \cdot E(t). \tag{8}$$

温度の時間依存性は（6）式を時間微分することにより陽に取り出せて、

$$dT(t)/dt = E^T(t) \cdot [D(t), dD(T(t))/dT(t)] \cdot P(t)/\{E^T(t) \cdot d^2D(T(t))/dT^2(t) \cdot P(t)\} \tag{9}$$

ただし $[A,B] \equiv AB - BA$ と定義した。これが講演でのメインな結果である。

3　応用

応用として以下の問題を議論した。

•two-level 系での温度の時間変化と残留エネルギー

微分方程式の解として長時間での温度のログ依存性を得た。[2]

• ツァリス統計の場合の温度の時間変化と残留エネルギー

この場合は指数関数的な温度の減衰が得られた。

•Kullback-Leibler entropy とエントロピー生成

最適な温度制御をした場合と、そうでない場合での温度変化の過程（非平衡過程）での

KL エントロピーの変化とエントロピー生成（正）を比較した。

• 小規模な巡回セイルスマン問題への応用

詳しくは現在論文を準備中である。[3]

4 参考文献について

参考文献

[1] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt and P. Vecchi, Science **220** (1983), 671.

[2] D. Fuse and D. S. Fisher, PRL, **57** (1986), 2203
S. Shinomoto and Y. Kabashima, J. Phys. **A 24** (1991), L141.

[3] T. Munakata and Y. Nakamura, in preparation..